モンテカルロシミュレーションによる
1次元界面の研究*鯉 淵 弘 資^{*1}

A Monte Carlo Study of One-Dimensional Interfaces

Hiroshi KOIBUCHI

We study numerically one-dimensional interfaces by a Monte Carlo technique, where an interface is viewed as a loop embedded in one-, two- and three-dimensional Euclidean spaces. Since an actual interface has a surface tension, the action of the interface is defined on the basis of certain characteristic features possessed by a surface tension. The action contains an area energy term and a bending energy term with a dimensionless constant called rigidity. We find that the interfaces become smooth (crumpled) when the rigidity becomes large (small), and that there are no phase transitions of the first or second order. We can think of the absence of the phase transitions as indicating that there is no rapid mixing of the two materials separated by one-dimensional interfaces when the temperature of the system changes slowly.

Key Words: Numerical Analysis, Surface Tension, Interface, Monte Carlo Simulation, Phase Transition

1. 序論

表面はある物質のもっとも外側のものであるが、これに対して界面^(1,2,3)は二つの物質の間に存在するものとして定義され、通常は2次元の膜のようなものと直観的には理解できる。例えば、ある容器内の水と油はそれらが混じり合わないとなればその境界が2次元界面となる。その容器に外部から振動や熱を加えれば界面は運動し始める。例えば温度が高くなるにつれて界面はその変形量が増すであろう。この変形を界面が隔てている二つの物質の混じり合いと対応させれば、物質の混合という複雑な問題を界面の変形に関する相転移という観点から見ることもできる。本論文では2次元物質を隔てる(および1、3次元物質内に在る)1次元界面をモデル化し、Monte Carlo (MC) シミュレーションの方法^(4,5)で、特に、界面の変形に関して相転移、すなわち、界面形状が温度の微小上昇で急激に複雑になり、界面の両側の流体の急激な混合が進む現象、が見られるかどうかということに焦点を当てて研究する。

ある現象の理論的モデルに基づくシミュレーションの結果の評価は最終的には現実の現象あるいはその実

験モデルに対する実験結果との比較によってなされるべきである。しかし、一方では数値流体力学などに見られるようにシミュレーションを数値実験と呼んで一つの実験と見なす立場も存在する。この観点からは、理論的モデルが根拠のあるものであればその数値実験結果は実際の実験による結果とはある程度独立して意味あるものと見なせるのではないと思われる。

粒子の力学における質点のように二つの物質の境界である界面を一つの物体と見なしその広がった物体の力学すなわち界面の動力学を理解しようとする研究は物性物理学の一つのテーマでもある^(2,3)。また、本論文では界面をある自由度を持った変数の力学系の集まりと見て界面の相転移などを調べるがそれは一つ一つの力学系の集団的振舞いを調べることに相当し、従って、界面を熱統計力学的に取り扱うことになる。このように本論文の界面のモデルは物性物理学などの分野で用いられているものと同様であり、それを調べる手

図1 1次元界面の例

* 原稿受付 平成4年1月27日。

*1 正員、茨城工業高等専門学校 (〒312 勝田市大字中根字深谷津 866)。

法はその分野などで広く使われている統計力学的手法である。しかし、界面あるいは界面の変形による物質の混合などの現象自体は工学的研究の対象となるものであることは現象の性質から見て明らかである。従って、界面の相転移についてそれに関する有効な手法を用いていろいろな角度から詳しく調べておくことは工学的にも意味のあることと考えられる。

2. 界面のモデル

本論文では1次元界面を対象とする。それは、序論でも述べたように、例えば図1に示した側面を閉じた薄い板の間にある水と油の境界のようなものである。図1では界面は2次元の物質の境界となっているが、ここではこのことを少し拡張して D 次元ユークリッド空間 R^D にある1次元物体を考える。とは言っても $D \geq 4$ は現実的でないから $D=1, 2, 3$ とする。図1の界面は $D=2$ でありこの場合が最も現実的であるがここでは少し拡張して $D=1$ と3の場合も調べる。

数学的には界面は実数の区間 $I=[0, 1]$ の R^D への埋め込み写像 $X: I \rightarrow R^D$ における I の像 $X(s)$, $s \in I$ と見なせる(図2)。ここで、区間 $[0, 1]$ は便宜的なものでありどのような有限区間でも変数変換すれば同じものを表すことを注意しておく。 $X(s)$ は界面の位置で、座標で表せば $X(s) = (X^1(s), \dots, X^D(s))$ となり D 次元の数ベクトルである。 $X(s)$ は以後 X^μ , $\mu=1, \dots, D$ あるいは $\vec{X}(s)$ と書き、 R^D 内の界面を、実数区間と同じ記号を用いて、 I と書く。なお、 I は R^D の中で交ってもよいとする。

さて、界面のモデルを作るといことはその作用を定義するということであるから、現実の界面の持つエネルギーに着目する。界面は表面張力を持つことで特徴付けられる。まず、表面張力は界面にその面積(1次元界面ではその長さ)をより小さくさせる性質を持っている。この性質を界面のものと見ればそれは界面の面積エネルギーによって表されるであろう。さらに、表面張力は界面にその面積が一定ならばより滑らかな形状をとらせる。つまり、界面は面積が一定という条件でとり得るいろいろの形状の内最も滑らかなものを選択する。すなわち、界面は曲げに対して弾性的

図2 区間 I の R^D への埋め込み写像

に振るまう。この性質は界面の曲げエネルギーによって表されるであろう。それは $D=2$ で1次元界面の場合法線ベクトルを $\hat{n}(s)$ とすると $\int (\frac{d\hat{n}}{ds})^2 ds$ に比例する量として定義される。 I の曲率を K とすればフレネー・セレーの公式は $\frac{d\hat{n}}{ds} = -K \frac{d\vec{X}}{ds}$ となる。従って、 $(\frac{d\hat{n}}{ds})^2 \sim K^2$ となって曲げエネルギーは I の曲率の2乗を積分したもの $\int K^2(s) ds$ に比例する。 $D=3$ の場合は法線ベクトルが2つになり振率も登場するが曲げエネルギーは同様に定義される。

以上の議論から1次元界面に対して次のような作用 S が定義できる:

$$S = a \int \sqrt{\left(\frac{dX^\mu}{ds}\right)^2} ds + b \int \left(\frac{d\hat{n}}{ds}\right)^2 ds \quad (1)$$

ここで、 a, b は実数でそれぞれ長さの逆数の次元、無次元の定数である。以後、簡単のため $a=1$ とし、 b を曲げこわさと呼ぶ。

次に式(1)を離散化する。ここで、界面の境界すなわち I の両端を同一点と見なすことにする。このことは I の境界を無くしたことに相当し、 I はループとなる。 I は図3のように区分的には直線となるように離散化できる。一つ一つの直線はボンドあるいはリンク、接点はノードあるいはサイトなどと呼ばれる。ボンドの総数とノードの総数は等しく、それを N とする。ノード i と $i+1$ を結ぶボンドの長さを l_i とし、 l_{i-1} と l_i の間のなす角を θ_i とすると作用(1)は次のように離散化される:

$$S_A = \sum_{i=1}^N l_i + b \sum_{i=1}^N [1 - \cos \theta_i] \quad (2)$$

第1項は明らかである。第2項も $\hat{n}_{i+1} - \hat{n}_i = \frac{d\hat{n}}{ds}$, $(\hat{n}_i)^2 = (\hat{n}_{i+1})^2 = 1$ などを使えばほとんど明らかである。ここで、パラメータ s は適当に選んで $\Delta s=1$ となるようにしてあるとする。また、定数 $2b$ を新たに b とした。作用(2)で定義される離散化された界面をここではモデルAと呼ぶ。

次にモデルBを定義する。それは式(1)の右辺第1項で根号を除いたものである。すなわち、モデルBの離散化された作用を

図3 1次元界面の離散化

$$S_B = \sum_{i=1}^N l_i^2 + b \sum_{i=1}^N (1 - \cos \theta_i) \quad (3)$$

と定義する。なお、 $\left(\frac{dX^\mu}{ds}\right)^2$ は s を時刻と見れば変数 X^μ が表す物体の運動エネルギーと見ることもできる。

このとき界面はポテンシャル $b \int \left(\frac{dn}{ds}\right)^2 ds$ の中で動く粒子の軌跡と見なすこともできる。

3. MC 計算

3.1 MC法 Newton 力学の決定論的な立場をとるならばモデルは作用を決めれば定義されるが、例えば多数の粒子の集団的振舞いを調べるならば熱力学的あるいは統計力学的な観点から現象を見なければならぬ。本論文の界面は位置ベクトルが $\vec{X}(s)$ であるようなある粒子が N 個集まった系と見なせるから、統計力学的には界面のモデルは作用と分配関数によって定義されることになる。

分配関数 Z をモデル A、B に対して

$$Z = \int \prod_{i=1}^{N-1} dX_i \exp(-S_{\text{tot}}) \quad (4)$$

と定義する。 dX_i はノード i の D 次元積分で、 N 個のノードの内一つは界面 l を R^D のなかで固定するために積分せずにおく。 S_{tot} はモデル A、B の作用 (2)、(3) で右辺第 1 項を S_1 、第 2 項を bS_2 と書き

$$S_{\text{tot}} = S_1 + bS_2, \quad (5)$$

$$S_1 = \begin{cases} \sum_i l_i & \text{for Model A} \\ \sum_i l_i^2 & \text{for Model B} \end{cases} \quad (6)$$

とする。本論文の界面は (4) の分配関数と (5)、(6) の作用で定義されることになる。また、任意の物理量 Q の平均値 $\langle Q \rangle$ は Z により

$$\langle Q \rangle = \int \prod_{i=1}^{N-1} dX_i Q \exp(-S_{\text{tot}}) / Z$$

と定義される。

Z の積分の計算にはノード数 N を一定に保つという条件で MC シミュレーションを行う。変数 X に対する基本的 MC ステップは図 4 のように

$$X_i^\mu \rightarrow X_i^{\mu'} = X_i^\mu + \delta X_i^\mu \quad (7)$$

とする。 δX_i^μ は X_i^μ を中心とした半径 ρ の D 次元球面上の点を一様乱数で選んで決める。式 (7) の変化によ

図4 基本的MCステップ

る全作用の変化 $\delta S_{\text{tot}} = S_{\text{tot}}(X_i^{\mu'}) - S_{\text{tot}}(X_i^\mu)$ を計算し、その値によって $X_i^{\mu'}$ を新しい値として受け入れるかどうかをメトロポリス法⁽⁴⁾によって決める。すなわち、 $\delta S_{\text{tot}} < 0$ なら $X_i^{\mu'}$ を X_i^μ に代わる新しい値とする。 $\delta S_{\text{tot}} \geq 0$ なら一様乱数 $r \in [0, 1]$ を作り、 $r < \exp(-\delta S_{\text{tot}})$ なら $X_i^{\mu'}$ を新しい値とし、そうでなければ X_i^μ は元のままとする。 δX_i^μ の大きさすなわち半径 ρ の値は、受け入れ比率 (rate of acceptance) がほどよい値となるように、ボンドの平均長などと同関係させて適当な値を選ぶ。本論文では受け入れ比率を 0.4~0.8 程度とした。

ここで、 S_1 の平均値 $\langle S_1 \rangle$ が b によらず MC 反復中に常に一定の値

$$\langle S_1 \rangle = \begin{cases} D(N-1) & \text{for Model A} \\ \frac{D}{2}(N-1) & \text{for Model B} \end{cases} \quad (8)$$

となることを注意しておく。これをモデル A について確かめる。式 (1) の作用で $a=1$ とせずに a のまま残しておくとして分配関数 Z は $Z(a) = \int \prod_{i=1}^{N-1} dX_i \exp[-aS_1 - bS_2]$ となる。式 (8) の Z は $Z(a=1)$ であるから $\langle S_1 \rangle$ は $\langle S_1 \rangle = -\partial \ln Z(a) / \partial a|_{a=1}$ で計算される。ここで、 $X_i \rightarrow a^{-1}X_i$ と $Z(a)$ の積分変数をスケール変換すると $Z(a) = a^{-D(N-1)} \int \prod_{i=1}^{N-1} dX_i \exp[-S_1 - bS_2]$ となり、この $Z(a)$ を使って式 (8) が得られる。(8) の関係式は計算プログラムの一つのチェックに用いることができる。

ここで、曲げこわさ b は温度 T の逆数 $1/T$ と見なせることを注意しておく。ヘルムホルツの自由エネルギーを F としたとき F/T と作用 S_{tot} を対応させれば、 $b \leftrightarrow 1/T$ なる対応関係が導かれる。なお、このとき $-S_1$ は系のエントロピー、 S_2 は内部エネルギーと見なせる。

3.2 数値計算結果 界面 l の埋め込み次元としては実的な興味は $D=2$ の場合であるが、既に述べたように $D=1, 2, 3$ とする。 $D=1$ では各ノードの角 θ_i は 0 か π のどちらかの値をとる。

本論文のモデルでは n 次相転移点は分配関数の b に関する n 次導関数の値が不連続になる b の値として定義される。従って、1 次および 2 次相転移は S_2 とその比熱

$$C = \frac{b^2}{N} (\langle S_2^2 \rangle - \langle S_2 \rangle^2) \quad (9)$$

が b の関数として不連続に変化するかどうかを見れば調べられる。 S_2 や C にたとえ不連続が現れるとしてもそれは $N \rightarrow \infty$ なる熱力学的極限でのことであり、数値計算 ($N \neq \infty$) ではそれらは連続的に変化する。しかしながら、有限サイズスケリングの考えかた⁽⁶⁾ に

従えば、もし1次か2次の相転移が起っていればその臨界点 b_c で比熱のピークの高さ $C(b_c)$ はノードの総数 N とともに大きくなり、

$$C(b_c) \sim N^\sigma, \quad \sigma > 0 \quad (10)$$

と変化する。 σ が1なら1次、 $\sigma < 1$ なら2次の相転移となる。このことから N を変えて $C(b_c)$ を測定することにより相転移次数を推定できる。

次に興味ある量は界面の乱雑性を表すフラクタル次元（あるいはハウスドルフ次元） H である。 H は l の平均2乗サイズ

$$X^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (X_i^\mu - \bar{X}^\mu)^2, \quad \bar{X}^\mu \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i^\mu \quad (11)$$

により

$$X^2 \sim N^{\frac{2}{H}} \quad \text{at } N \rightarrow \infty \quad (12)$$

と定義される。 l が滑らかな円ならば上記定義から $H=1$ となることは容易に判る。また l が完全に乱雑になれば、平面をすきまなく埋め尽くす酔歩の場合と同様に、 $H=2$ となることが予想される。

以下では図表を使って計算結果を説明する。図5には $D=3, N=100$ の場合について横軸を sweep 数 (= MC 計算の反復回数) として X^2 と ボンド長 l を表示した。データは 20 sweep 毎に測定した。曲げこわさ b は $b=3.0$ である。各物理量が平衡状態の値に達する様子が明瞭になるように、界面の初期状態をそのボンド長が式 (8) で予想される値よりかなり大きくなるような円形とした。 S_1, S_2 などについても同様の図が得られた。 D と N の値についてはそれぞれ小さい値の場合が平衡状態に達するまでの sweep 数は少なく済むことも確認できた。 $D=3$ では曲げこわさの値が $b \sim 3$ 程度のときモデル A、B とも収束が最も悪くなることが確認できた。図5は最も悪い条件での結果を表示したものである。

図6には X^2 の自己相関係数

図5 X^2 と l, l^2 の平衡値に近づく様子

$$A_c(X^2) = \frac{\sum_i X^2(\tau_{i+1}) \sum_i X^2(\tau_i)}{\left[\left(\sum_i X^2(\tau_{i+1}) \right)^2 \left(\sum_i X^2(\tau_i) \right)^2 \right]^{1/2}} \quad (13)$$

$$\tau_{i+1} = \tau_i + n \times 20, \quad n = 1, 2, \dots$$

を示す。ここで、 τ_i は X^2 を計算した MC 時間で 20 sweep の整数倍の時間間隔 $n \times 20$ を持つ。 $A_c(X^2)$ は図5のようなデータから平衡値に達するまでのデータを除いた残りから計算した。 $A_c(X^2)$ は X^2 のサンプル間の統計的独立性を表す目安となる。他の物理量に対しても自己相関係数は同様に定義できる。しかし、 X^2 のような非局所的な量が統計的に独立となる MC 時間間隔は例えば S_2 のような局所的な量の場合に比べて格段に大きくなる。このため X^2 について調べれば十分である。図6からは良い初期状態を選べば初期化のための sweep 数は例えば $D=3, N=50$ では 2×10^4 程度で十分であることが推測できる。 $D=3, N=100$ ではさらに多くの初期化 sweep 数が必要となる。以後は特に断らないが MC 計算の初期状態の界面の形状はボンド長が (8) から予測される値となるような円形とする。

図7には1ノード当りの内部エネルギー S_2/N およびその比熱 C を示す。 S_2 の計算では各 b で $1 \times 10^5 \sim 2 \times 10^5$ sweep の MC 反復回数内、初めの $2 \times 10^4 \sim 5 \times 10^4$ sweep を除いた残りから 20 回毎にデータを測定し平均した。 b は大きい方から順に小さくしていき、各 b で変数の最終状態を次の b の初期状態とした。図中にはたて棒で各データの標準偏差を示したがその値は小さくて各シンボルの大きさ以下となっている。 $D=2, 3$ では二つのモデルとも格子サイズ N が変化しても S_2 の b 依存性は変わらないように見える。このことは $D=2, 3$ では1次あるいは2次の相転移が起っていないことを示している。 C の誤差を表す統計誤差 ΔC も図にたて棒で示したが、それは次のように定義される。 S_2 の MC サンプルの総数を f 個とし、 f を N_{bin} 個に等分する。分割された各 f/N_{bin} 個の S_2 から式 (9) によって $C_i, i=1 \sim N_{bin}$ を計算する。 C_i の平均値を $\bar{C}$ とすると ΔC は

$$\Delta C = \frac{1}{N_{bin}} \left(\sum_{i=1}^{N_{bin}} (C_i - \bar{C})^2 \right)^{1/2} \quad (14)$$

図6 X^2 の自己相関係数対サンプリング間隔

図7 1ノード当りの内部エネルギーとその比熱

と計算される。なお、 f/N_{bin} の大きさは S_2 が統計的に独立になる時間間隔より大きくとればよく、ここでは $f/N_{\text{bin}}=2000\sim 3000$ としたから全ての場合に十分である。 $D=2,3$ では C にピークがないことから相転移が起っていないことが判る。 $D=1$ ではどちらのモデルでもピークが見えるがその高さが格子サイズ N と共に大きくなっているかどうか明白ではない。さらに長く計算してサンプル数を増やせばこのことを明らかにできると考えられる。図からは $D=1$ ではその相転移が2次である可能性を否定できない。

図8には X^2 対 b を $D=1,2$ の場合について示す。 b が十分小さい時界面はくしゃくしゃになってしぼんでいるため X^2 は小さいが b が大きくなるにつれて界面はふくらんで X^2 は大きくなり、 b が十分大きくなると界面は円形になり X^2 はその半径の2乗に等しくなると関係式(8)から予期される一定の値をとる。図8の b は中間的な値とした。図8からは X^2 の b による変化が滑らかであることが判る。このことは図7で判明した事実、すなわち、明確な1,2次の相転移がないということと首尾一貫している。

図9には X^2 対 N をlog-logスケールで表す。直線

図8 X^2 対 b

図9 X^2 対 N 表1 モデルA, Bのフラクタル次元 $H(A)$, $H(B)$

D=1			D=2		
b	H (A)	H (B)	b	H (A)	H (B)
1.5	0.99(4)	1.19(7)	3.5	1.04(3)	1.18(7)
1.3	1.27(4)	1.28(4)	3.0	1.08(7)	1.10(9)
1.1	1.43(3)	1.69(9)	2.5	1.17(2)	1.33(9)
0.9	1.98(40)	1.72(10)	2.0	1.48(27)	1.48(18)
0.7	2.09(19)	1.83(17)	1.5	1.53(23)	1.87(8)
0.5	2.02(18)	1.88(9)	1.0	2.14(13)	2.18(18)
0.3	1.70(8)	1.88(5)	0.5	1.91(9)	1.81(11)

の傾きからフラクタル次元 H が求まる。すなわち、式 (12) : $X^2 = c_0 N^{2/H}$ から最小 2 乗法で c_0 と H が求まる。最小 2 乗法の重みには X^2 の標準偏差の逆数を用いた。表 1 には図 9 のデータから計算したフラクタル次元を示す。相転移がないことから H は 1 から 2 へ b に対し滑らかに変化すると期待できるが、二つのモデルとも結果はそうになっている。

4. 結論

本論文では 1 次元界面の数値実験モデル 2 つを MC 法で研究した。それらのモデルは表面張力の持つ一般的な性質から全く自然に構成されたものである。界面の埋め込み次元 D は 1, 2, 3 とした。内部エネルギーとその比熱の計算から $D=2, 3$ では 1 次、2 次相転移がないこと、 $D=1$ では 2 次あるいはより高次の相転移がありそうなが判った。さらに、2 乗平均サイズ X^2

の計算から界面のフラクタル次元 H が求まり、曲げこわさ b が大きい時 $H \sim 1$ 、 b が小さい時は $H \sim 2$ となること、また H の 1 から 2 への変化は b に対してゆるやかであることを $D=1, 2$ で確かめた。なお、これらの結果は例えば図 1 のような現実の界面を本論文のモデルが表しているとすれば、界面にはその温度を境に 2 種類の物質の混合の状態が急激に変化するような臨界温度がないことを示している。

本論文では MC 法で数値実験したが例えばランジュバン方程式の方法、分子動力学の方法など他の方法による数値実験も興味深い。また、本論文で用いたモデルと実際の界面の間で大きく異なって見えることは実際の界面はその長さが変化した自分自身とは交らないということであろう。これらの性質をとりいれた数値実験も興味を持たれる。ここで、本論文のモデルがこれらの性質を備えていないからといって現実の界面と完全に異なるとはいえないことを注意しておく。というのは、 b の値が小さい時には界面はくしゃくしゃになって確かに現実のものとは異なっているが、 b の値が大きくなってくると界面は滑らかになって自分自身と交らなくなるから b のある限られた範囲において本論文の界面モデルが現実の界面と対応することは十分にあり得るからである。また、3 次元空間に埋め込まれた 2 次元界面が最も興味深い対象となるであろう。本論文の研究は界面に関する研究の初期的な段階にあり一つの試みでもある。界面は工学的な研究の対象となるものであるから以上のような問題を含め多くの問題が数値実験やその他の手法によって広く研究されることが望まれる。

本論文の作成に当っては卒研究生の小池、大川、辻の各氏にはいろいろと協力して頂き感謝する。

文献

- (1) 甲斐, 数理学, 23-9, No. 267, (1985), 55.
- (2) 太田, 物理学最前線 10, (1985), 1, 共立出版.
- (3) R. Lipowsky, In *Fundamental Problems in Statistical Mechanics VII*, (1990), 139, North-Holland.
- (4) D. W. Heermann, シミュレーション物理学, (1990), 57, シュプリンガーフェアラーク東京.
- (5) K. Binder and D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, (1988), 1, Springer.
- (6) M. N. Barber, In *Phase Transitions and Critical Phenomena Vol. 8*, (1983), 145, Academic Press.